Лекция №6

Симплексный метод планирования

Метод симплексного планирования

Метод симплексного планирования позволяет без предварительного изучения влияния факторов найти область оптимума. В этом методе не требуется вычисления градиента функции отклика, поэтому он относится к безградиентным методам поиска оптимума. Для этого используется специальный план эксперимента в виде симплекса.

Симплекс — это простейший выпуклый многогранник, образованный k+1 вершинами в k-мерном пространстве, которые соединены между собой прямыми линиями. При этом координаты вершин симплекса являются значениями факторов в отдельных опытах. Так, например, в двухфакторном пространстве (на плоскости) k=2 симплекс — любой треугольник, в трехфакторном (трехмерном) k=3 пространстве — тетраэдр и т.д.

Симплекс называется правильным или регулярным, если все расстояния между образующими его вершинами равны (равносторонний треугольник, правильный тетраэдр и др.).

После построения исходного симплекса и проведения опытов при значениях факторов, соответствующих координатам его вершин, анализируют результаты и выбирают вершину симплекса, в которой получено наименьшее (наихудшее) значение функции отклика. Для движения к оптимуму необходимо поставить опыт в новой точке, являющейся зеркальным отображением точки с наихудшим (минимальным) результатом относительно противоположной грани симплекса.

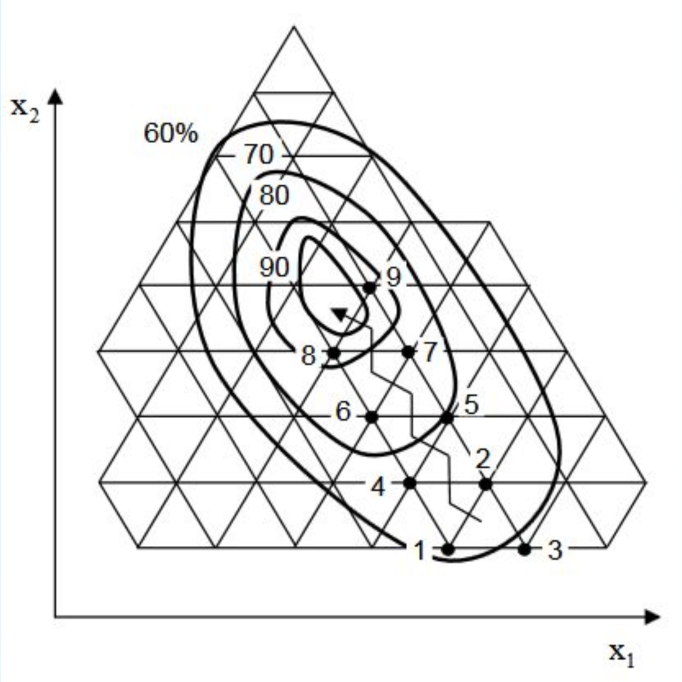

Рис. 1. Схема движения к оптимальной области симплексным методом

По итогам проведения опытов 1, 2 и 3 худшим оказался опыт 3. Следующий опыт ставится в точке 4, которая образует с точками 1 и 2 новый правильный симплекс. Далее сопоставляются результаты опытов 1, 2 и 4. Наихудший результат получен в точке 1, поэтому она в новом симплексе заменяется зеркальным отображением (точкой 5) и т.д., пока не будет достигнута почти стационарная область.

Следует заметить, что хотя этот путь и зигзагообразен, общее число опытов, необходимых для достижения области оптимума, может быть небольшим за счет того, что проводить k+1 опыт приходится лишь в начале, а в дальнейшем каждый шаг сопровождается проведением только одного дополнительного опыта, условия которого выбираются на основе предшествующих результатов.

После изложения основных идей симплексного метода планирования оптимальных экспериментов остановимся на некоторых его деталях. Выбор размеров симплекса и его начального положения в известной степени произволен.

Для построения начального симплекса значения в каждом опыте исходного симплекса определяются по формуле:

$$x_{ij} = x_{i0} + C_{ij}\Delta x_i$$

где x_{i0} — координаты центра начального симплекса; Δx_i — интервал варьирования i-го фактора; C_{ij} — кодированное значение i-го фактора для j-го опыта, выбираемые из числовой матрицы для симплексного планирования, приведенные в табл.1

Таблица№1 - Коэффициенты C_{ij} для выбора координат симплекса

				…		
1				…		
2				…		
3				…		
4				…		
…	…	…	…	…	…	
k	0	0	0	0		
k+1	0	0	0	0	0	

$$k_i = \sqrt{\frac{1}{2i(i+1)}}$$

$$R_i = \sqrt{\frac{i}{2(i+1)}}$$

$$i = 1, 2, \ldots, k$$

k - число факторов

Рассмотрим пример симплекс-плана для двух факторов.

В начале ставят три опыта со следующими координатами:
1-ый опыт

$$x_{11} = x_{10} + k_1 \Delta x_1$$
$$x_{21} = x_{20} + k_2 \Delta x_2$$

2-ой опыт

$$x_{12} = x_{10} - R_1 \Delta x_1$$
$$x_{22} = x_{20} + k_2 \Delta x_2$$

3-ий опыт

$$x_{13} = x_{10} + 0$$
$$x_{23} = x_{20} - R_2 \Delta x_2$$

Симплекс, рассчитанный по этим формулам, представлен на рис. 2

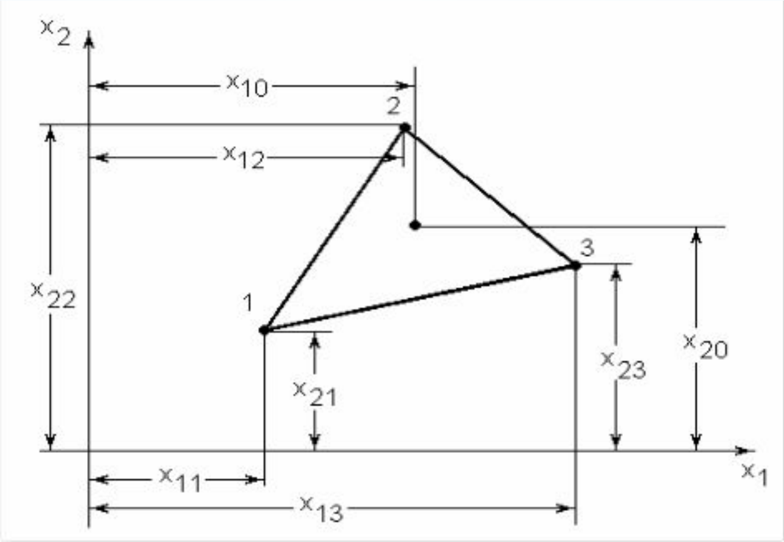

Рис. 2. Схема построения начального симплекса

Так, если $x10=0$ и $x20=0$, а$\Delta x1=\Delta x2=1$, то координаты опытов будут равны (см. рис.3):

опыт 1 (0,5;0,289),

опыт 2 (-0,5; 0,289)

опыт 3 (0;-0,577),

что соответствует координатам вершин равностороннего треугольника с длиной стороны, равной 1.

Начало координат в этом случае находится в точке пересечения медиан (биссектрис).

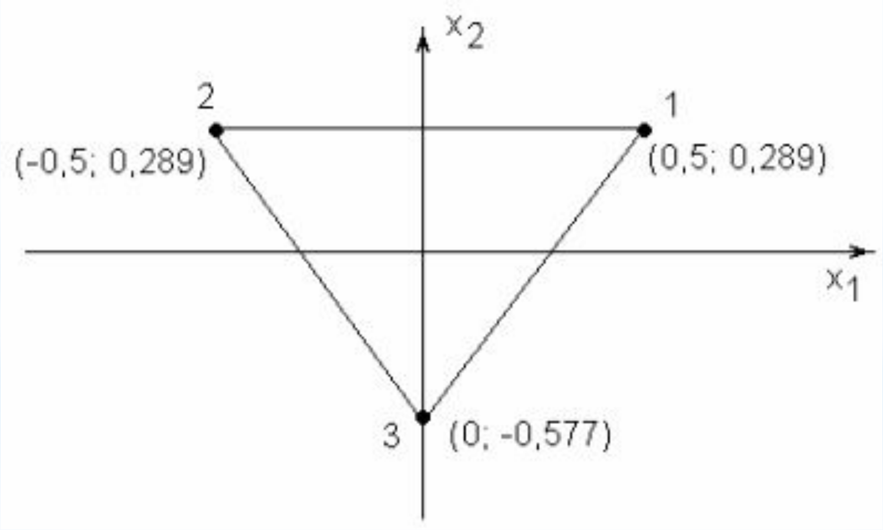

Рис. 3. Координаты вершин симплекса

Для определения условий проведения опыта в отраженной точке (координат новой вершины симплекса) используется формула:

$$x_{i\text{н}} = \frac{2}{k}\sum_{j=1}^{k+1} x_{ij} - x_{i\text{з}}\,,\ \mathrm{j} \neq i_\text{з}$$

где $x_{i\text{н}}$ — координата новой точки (новой вершины) симплекса для i-й переменной;
$x_{i\text{з}}$ — координата заменяемой точки (координата вершины симплекса с наихудшим откликом перед ее отбрасыванием);
$\frac{2}{k}\sum_{j=1}^{k+1} x_{ij}$ — среднее значение из координат всех вершин симплекса, кроме заменяемой.

Известны следующие критерии окончания процесса последовательного отражения наихудших вершин и постановки очередных опытов в новых вершинах:

1. Разность значений функции отклика в вершинах симплекса становится меньше ранее заданной величины. Это означает либо выход в "почти стационарную" область в близи оптимума, либо достижение участка поверхности $\hat{y} = f(x_1, x_2, \dots, x_k) = const$ в виде "плато". В этом случае дополнительными опытами в стороне от симплекса следует удостовериться в отсутствии других участков с более существенной кривизной поверхности $y = f(x_1, x_2, \dots, x_k)$ и принять величину с экстремальным значением функции отклика за точку оптимума.

2. Отражение любой из вершин симплекса после однократного качания приводит к его возврату в прежнее положение. При этом есть основания утверждать "накрытие" симплексом точки оптимума.

3. Циклическое движение симплекса вокруг одной из его вершин на протяжении более чем нескольких шагов. Подобная ситуация имеет место, когда искомый оптимум располагается внутри области, охватываемой циркулирующим симплексом.

В случаях 2 и 3 рекомендуется уменьшить размеры симплекса, т.е. рас-стояния между вершинами, и продолжить поиск до желаемого уточнения координат искомого оптимума. Изложенный алгоритм симплексного метода сравнительно прост, он достаточно эффективен, однако работает не достаточно быстро.

Существует его модификация, известная под названием "метод деформируемого симплекса", которая ускоряет процесс поиска оптимума за счет использования на данном шаге информации, накопленной на предыдущих шагах.

Сущность метода поиска по деформированному симплексу заключается в том, что при отражении наихудшей вершины относительно центра тяжести противоположной грани размер симплекса не остается постоянным, а осуществляется его деформация (растяжение или сжатие). Для пояснения существа метода введем координату центра тяжести $\bar{x}_i$ остальных (за исключением наихудшей) вершин симплекса:

$$\bar{x}_i = \sum_{j=1}^{k+1} \frac{x_{ij}}{k}; j \neq i_s$$

Тогда формула $x_{i\text{н}} = \frac{2}{k}\sum_{j=1}^{k+1} x_{ij} - x_{i\text{з}}$, j $\neq i_\text{з}$ может быть преобразована к виду

$$x_{i\text{н}} = 2\bar{x}_i - x_{i\text{з}}$$

Или

$$\tilde{x}_{i\text{н}} = \bar{x}_i + \alpha(\bar{x}_i - x_{i\text{з}})$$

Введем обозначения:
$y_з$ — наихудший (минимальный) отклик в симплексе;
y_{max} — наилучший (максимальный) отклик;
$y_з'$ — отклик, следующий за наихудшим.

Следовательно $y_з < y_{max} < y_з'$

В зависимости от значения функции отклика в точке нормального отражения $y_н$ при α=1 возможны следующие варианты:

1) если $y_з < y_н < y_{max}$, т.е. $x_{iн}$ будет не худшей и не лучшей точкой в новом наборе точек, то $x_{iз}$ следует заменить на $x_{iн}$ с α=1. В этом случае осуществляется нормальное отражение;

2) если $y_н > y_{max}$, то $x_{iн}$ оказывается новой лучшей точкой в новом наборе точек. В этом случае направление растяжения признается “весьма удачным” и симплекс растягивается в нормальном направлении. Для этого случая 1<α<2 и α называется коэффициентом растяжения;

3) если $y_з < y_н < y_з'$, то направление отражения признается правильным, но симплекс слишком велики его следует сжать выбором коэффициента сжатия α из диапазона 0<α<1;

4) если $y_н < y_з$, то даже направление отражения выбрано не верно и следует осуществить отрицательное сжатие выбором отрицательного значения коэффициента α (-1<α<0).

Таким образом, на каждом шаге следует в начале нормально отразить наихудшую вершину симплекса (α=1), поставить в этой точке опыт, определить $y_н$, а затем поставить следующий опыт в точке факторного пространства $\tilde{x}_{iн}$, координаты которой определяются по формуле

$$x_{iн} = \frac{2}{k}\sum_{j=1}^{k+1} x_{ij} - x_{iз}, \mathrm{j} \neq i_з$$

с учетом рассмотренных вариантов 1-4.

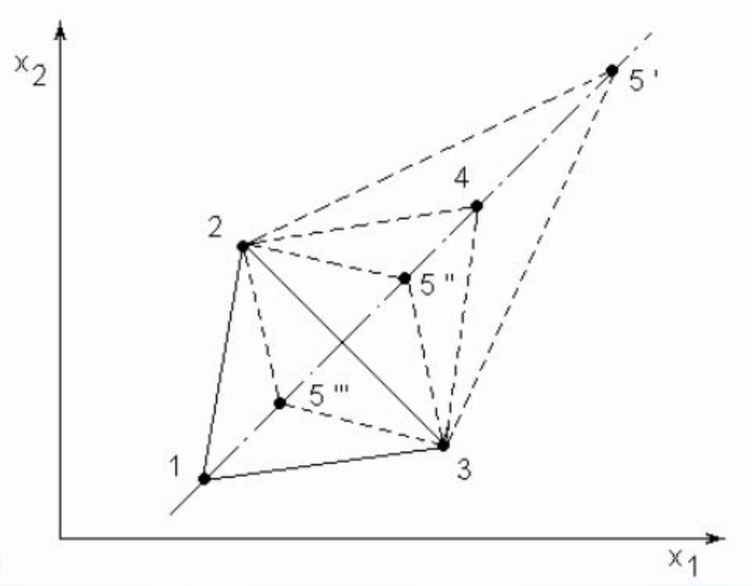

Рис.4. К методу деформированного симплекса

На рис .4 показаны точка 4 очередного опыта при нормальном отражении (α=1) наихудшей вершины 1, точки 5’, 5’’, 5’’’ последующих опытов для случаев соответственно растяжения (α=2), сжатия (α=0,5) и отрицательного сжатия (α=-0,5) симплекса.
Таким образом, метод поиска по деформированному симплексу обладает повышенной гибкостью, позволяющей учитывать особенности поверхности отклика.